

Chapitre 3

Modélisation et calcul numérique

3.1. Introduction :

La modélisation des composants à semi-conducteurs consiste à trouver les caractéristiques essentielles d'une structure, comme la caractéristique courant-tension, capacité-tension,... etc. à partir des paramètres proposés, avant de faire la validation par l'expérimentation.

Dans notre modélisation numérique, on va tout d'abord considérer le cas de deux structures $p^+n^-n^+$ et $n^+p^-p^+$ au silicium irradié, lui appliquer l'ensemble des équations décrivant le mécanisme de transport (les équations de continuité pour les deux types de porteurs et l'équation de poisson).

Trois approches peuvent être adoptées pour résoudre les équations régissant le transport dans les semi-conducteurs :

- Une approximation pour obtenir des solutions analytiques.
- Une linéarisation, ou l'analyse dans le cas des petits signaux.
- Une simulation numérique des équations entières.

Pour la résolution numérique des équations, on utilise la méthode des différences finies en considérant seulement le cas unidimensionnel, c'est à dire que les différentes variables recherchées ne seront fonction que de la coordonnée spatiale x . la capacité est ensuite calculée par la méthode de l'énergie potentielle (voir 3.20).

3.2. Les équations fondamentales pour l'analyse statique :

Trois équations aux dérivées partielles, non linéaires, décrivant le comportement électrique des semi-conducteurs dans un état stationnaire sont présentées ci-dessous pour le cas de l'analyse d'une structure homogène unidimensionnelle (pour $p^+ n^- n^+$ ou $n^+ p^- p^+$).

1) L'équation de Poisson :

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -\frac{q}{\varepsilon} (\Gamma + p - n + N_{TD}^+ - N_{TA}^-)$$

(3.1.a)

2) Les deux équations de continuité :

Pour les électrons :

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{q} \cdot \frac{\partial J_n}{\partial x} + G - U = 0 \quad (3.1.b)$$

Pour les trous :

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{1}{q} \cdot \frac{\partial J_p}{\partial x} + G - U = 0 \quad (3.1.c)$$

3) Le courant :

Pour les électrons :

$$J_n = qD_n \frac{\partial n}{\partial x} - q\mu_n n \frac{\partial \psi}{\partial x} \quad (3.2.a)$$

Pour les trous :

$$J_p = -qD_p \frac{\partial p}{\partial x} - q\mu_p p \frac{\partial \psi}{\partial x} \quad (3.2.b)$$

ψ : Le potentiel. n : La densité d'électrons. p : La densité de trous.

G : Le taux de génération.

U : Le taux de recombinaison.

Γ : La différence des densités d'accepteurs et donneurs superficiels ($N_D - N_A$).

$\mu_{n(p)}$: La mobilité des électrons (trous).

$D_{n(p)}$: La constante de diffusion des électrons (trous).

N_{TD}^+ : La densité de pièges donneurs ionisés. N_{TA}^- : La densité de pièges accepteurs ionisés.

$J_{n(p)}$: Le courant d'électrons (trous).

La mobilité généralement n'est pas constante, elle est fonction des impuretés et du champ électrique. Un exemple d'une relation empirique est donné par [28]:

$$\mu(x) = \left(\frac{\mu_{\max} - \mu_{\min}}{1 + \left(\frac{|N(x)|}{N_{ref}} \right)^\alpha} + \mu_{\min} \right) \cdot \frac{1}{\left(1 + \left(\frac{E(x)}{E_c} \right)^\beta \right)^{1/\beta}} \quad (3.3)$$

Avec:

$$|N(x)| = |N_D(x) - N_A(x)|$$

Les constants caractérisants la mobilité (pour le silicium) sont donnés dans le tableau 3.1.

Tableau 3.1 : Les paramètres de la mobilité [28]

	μ_p	μ_n
$N_{ref} \text{ (cm}^{-3}\text{)}$	6.3×10^{16}	8.5×10^{16}
α	0.76	0.72
$\mu_{\max} \text{ (cm}^2 \text{ / V. sec)}$	495	1330
$\mu_{\min} \text{ (cm}^2 \text{ / V. sec)}$	47.7	65
$E_c \text{ (V/cm)}$	1.95×10^4	8×10^3
β	1	2

La relation d'Einstein ($D_{n(p)} = (kT/q) \times \mu_{n(p)}$) permet de mettre les équations (3.2.a) et (3.2.b) sous la forme :

$$J_n = \mu_n \left(kT \cdot \frac{\partial n}{\partial x} - q \times n \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) \quad (3.4.a)$$

$$J_p = -\mu_p \left(kT \cdot \frac{\partial p}{\partial x} + q \times p \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) \quad (3.4.b)$$

Le taux de recombinaison est donné par la relation de Shockley-Read-Hall (équation 1.16). La structure étudiée n'est pas soumise aux excitations externes et elle ne fonctionne pas en régime de forts courants. Il en résulte que le taux de génération causé par les deux effets précédents est négligeable ($G = 0$).

Les densité des pièges donneurs et accepteurs ionisés (N_{TD}^+ , N_{TA}^-) sont donné par :

$$N_{TD}^+ = f \cdot N_{TD} \quad (3.5.a)$$

$$N_{TA}^- = (1-f) N_{TA} \quad (3.5.b)$$

Où f est la probabilité d'occupation du piège (équation 1.12)

3.3. Discrétisation spatiale des structures $p^+ n^- n^+$ et $n^+ p^- p^+$:

Les structures $p^+ n^- n^+$ et $n^+ p^- p^+$ considérées sont divisée sur leurs épaisseurs d en un nombre L de tranches verticales. Cela nous permet d'utiliser la méthode des différences finies et transformer les équations aux dérivées partielles du problème en équations algébriques linéaires résolubles par des méthodes numériques. Cette discrétisation spatiale des cellules peut être uniforme (à pas fixe) ou non uniforme (à pas variable).

La figure 3.1 montre la discrétisation considérée ou une double notation (h, h') est utilisée pour pouvoir distinguer les variables primitives n, p et ψ qui sont reliées aux nœuds principaux notés par N , et donc dépendantes du pas h , alors que les variables dérivées sont reliées aux nœuds secondaires situés au milieu des tranches et notés par M , et donc dépendantes du pas h' .

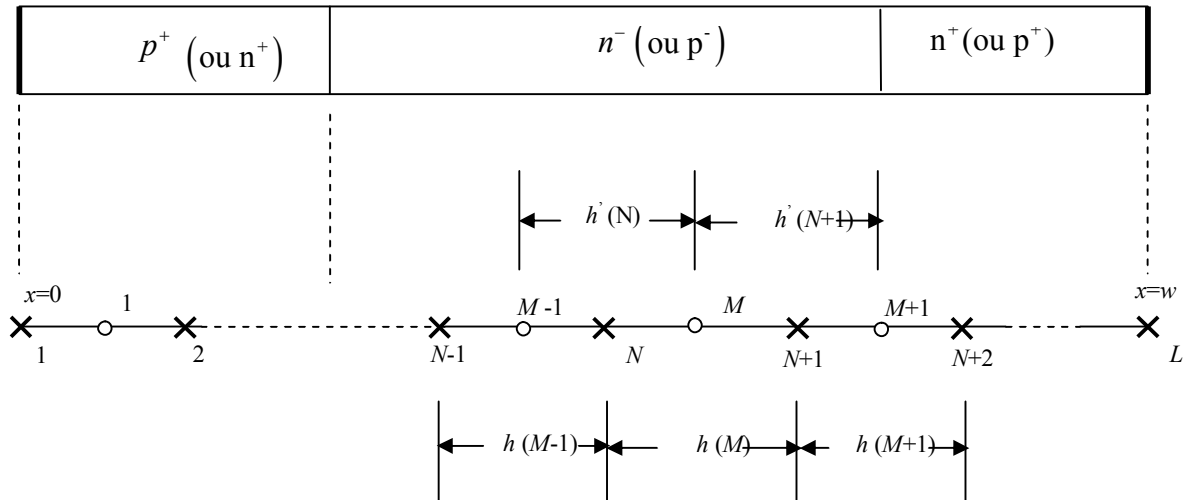


Figure.3.1 : Discrétisation spatiale de la structure $p^+ n^- n^+$ (ou $n^+ p^- p^+$) suivant la méthode des différences finies.

3.4. Discrétisation des équations par la méthode des différences finies :

La méthode de calcul de p , n et ψ est proposée en détail par Kurata [30] (1982).

La méthode des différences finies est utilisée dans notre problème, parce que la géométrie du domaine est simple. Cette méthode permet d'exprimer les dérivées en nœuds auxiliaires M de la manière suivante (voir Figure 3.1) :

$$\frac{\partial n}{\partial x}(M) = \frac{n(N+1) - n(N)}{x(N+1) - x(N)} \quad (3.6.a)$$

$$\frac{\partial p}{\partial x}(M) = \frac{p(N+1) - p(N)}{x(N+1) - x(N)} \quad (3.6.b)$$

$$E = -\frac{\partial \psi}{\partial x} = \frac{\psi(N) - \psi(N+1)}{x(N+1) - x(N)} \quad (3.6.c)$$

$x(N+1) - x(N) = h(M)$: est le pas de discrétisation.

L'équation de Poisson (3.1.a) se transforme à l'équation discrète suivante:

$$\gamma_1(N)\psi(N-1) + \gamma_2(N)\psi(N) + \gamma_3(N)\psi(N+1) = -\frac{q}{\varepsilon} \left[\Gamma(N) + p(N) + N_{TD}^+(N) - n(N) - N_{TA}^-(N) \right] \quad (3.7)$$

Avec:

$$\gamma_1(N) = \frac{1}{h(M-1)h'(N)} \quad \gamma_2(N) = -\frac{1}{h'(N)} \left(\frac{1}{h(M-1)} + \frac{1}{h(M)} \right)$$

$$\gamma_3(N) = \frac{1}{h(M)h'(N)}$$

La discrétisation des équations (3.1.b) et (3.1.c) par la méthode des différences finies pose un problème de non singularité dans la résolution du système d'équations (3.1.a, b et c). Pour cette raison qu'une méthode est proposée par Scherfetter et Gummel (1969) [29] pour éviter ce problème.

La méthode consiste à intégrer les équations (3.4.a) et (3.4.b) en considérant les constants : champ électrique, mobilité et la densité du courant entre le point N et $N+1$. Puis ces équations sont transformées en une autre forme, et elles s'écrivent :

$$J_p = -\frac{q\mu_p E}{1 - e^{\theta Ex}} \cdot (p(0) \cdot e^{\theta Ex} - p(x)) \quad (3.8.a)$$

$$J_n = -\frac{q\mu_n E}{1 - e^{-\theta Ex}} \cdot (n(0) \cdot e^{-\theta Ex} - n(x)) \quad (3.8.b)$$

$$\text{Avec: } \theta = \frac{q}{kT}$$

Les équations (3.8.a) et (3.8.b) sont équivalentes aux formes discrétisées données par :

$$J_n(M) = \frac{q}{h(M)} [\lambda_{n1}(M)n(N) + \lambda_{n2}(M)n(N+1)] \quad (3.9.a)$$

$$J_p(M) = \frac{q}{h(M)} [\lambda_{p1}(M)p(N) + \lambda_{p2}(M)p(N+1)] \quad (3.9.b)$$

Avec:

$$\lambda_{n1}(M) = \mu_n(M) \frac{\psi(N) - \psi(N+1)}{1 - e^{\beta(M)}}; \quad \lambda_{n2}(M) = \mu_n(M) \frac{\psi(N) - \psi(N+1)}{1 - e^{-\beta(M)}};$$

$$\lambda_{p1}(M) = \mu_p(M) \frac{\psi(N) - \psi(N+1)}{1 - e^{-\beta(M)}}; \quad \lambda_{p2}(M) = \mu_p(M) \frac{\psi(N) - \psi(N+1)}{1 - e^{\beta(M)}};$$

$$\beta(M) = \frac{q}{kT} (\psi(N) - \psi(N+1))$$

De la même façon, la discrétisation des équations (3.1.b) et (3.1.c) donne :

$$\frac{1}{q} \cdot \frac{J_n(M) - J_n(M-1)}{h'(N)} - U(N) = 0 \quad (3.10.a)$$

$$\frac{1}{q} \cdot \frac{J_p(M) - J_p(M-1)}{h'(N)} + U(N) = 0 \quad (3.10.b)$$

Puisque les quantités J_n , J_p , U , N_{TD}^+ et N_{TA}^- dans les équations précédentes sont non linéaires en fonction des variables p , n et ψ , alors elles sont linéarisées par le développement de Taylor, en négligeant les termes d'ordre supérieur à 1 :

$$J_n(M) \approx J_n^0(M) + \frac{\partial J_n^0(M)}{\partial n(N)} \delta n(N) + \frac{\partial J_n^0(M)}{\partial n(N+1)} \delta n(N+1) + \frac{\partial J_n^0(M)}{\partial \psi(N)} \delta \psi(N) + \frac{\partial J_n^0(M)}{\partial \psi(N+1)} \delta \psi(N+1) \quad (3.11.a)$$

$$J_p(M) \approx J_p^0(M) + \frac{\partial J_p^0(M)}{\partial p(N)} \delta p(N) + \frac{\partial J_p^0(M)}{\partial p(N+1)} \delta p(N+1) + \frac{\partial J_p^0(M)}{\partial \psi(N)} \delta \psi(N) + \frac{\partial J_p^0(M)}{\partial \psi(N+1)} \delta \psi(N+1) \quad (3.11.b)$$

$$U(N) = U^0(N) + \frac{\partial U^0(N)}{\partial p(N)} \delta p(N) + \frac{\partial U^0(N)}{\partial n(N)} \delta n(N) \quad (3.11.c)$$

$$N_{TD}^+(N) = N_{TD}^{+0}(N) + \frac{\partial N_{TD}^{+0}(N)}{\partial p(N)} \delta p(N) + \frac{\partial N_{TD}^{+0}(N)}{\partial n(N)} \delta n(N) \quad (3.11.d)$$

$$N_{TA}^-(N) = N_{TA}^{-0}(N) + \frac{\partial N_{TA}^{-0}(N)}{\partial n(N)} \delta n(N) + \frac{\partial N_{TA}^{-0}(N)}{\partial p(N)} \delta p(N) \quad (3.11.e)$$

Les termes J_n^0 , J_p^0 , U^0 , N_{TD}^{+0} et N_{TA}^{-0} sont déterminés en fonction des conditions initiales: n_0 , p_0 et ψ_0 . Les variables principales peuvent être écrites comme suit:

$$p(N) = p^0(N) + \delta p(n); \quad n(N) = n^0(N) + \delta n(N); \quad \psi(N) = \psi^0(N) + \delta \psi(N).$$

Si on remplace les équations (3.11.a, b, c, d et e) dans les équations (3.10.a et b) et avec l'équation (3.7) on obtient un système d'équations de trois variables de la forme :

$$A(N)\delta y(N-1) + B(N)\delta y(N) + C(N)\delta y(N+1) = F(N) \quad (3.12)$$

$$\text{Où} \quad \delta y = \begin{pmatrix} \delta n \\ \delta p \\ \delta \psi \end{pmatrix}$$

$2 \leq N \leq L-1$, C'est à dire que les points '1' et 'L' sont des conditions de type Dirichlet.

A , B et C sont des matrices de dimension 3×3 , F est un vecteur de dimension 3×1 . Leurs définitions sont données par :

- pour la matrice A :

$$A(1,2) = A(2,1) = A(3,1) = A(3,2) = 0;$$

$$A(1,1) = -\frac{1}{qh'(N)} \cdot \frac{\partial J_p^0(M-1)}{\partial p(N-1)}; \quad A(1,3) = -\frac{1}{qh'(N)} \cdot \frac{\partial J_p^0(M-1)}{\partial \psi(N-1)};$$

$$A(2,2) = -\frac{1}{qh'(N)} \cdot \frac{\partial J_n^0(M-1)}{\partial n(N-1)}; \quad A(2,3) = -\frac{1}{qh'(N)} \cdot \frac{\partial J_n^0(M-1)}{\partial \psi(N-1)};$$

$$A(3,3) = \frac{1}{h(M-1)h'(N)};$$

- pour la matrice B :

$$B(1,1) = \frac{1}{qh'(N)} \left[\frac{\partial J_p^0(M)}{\partial p(N)} - \frac{\partial J_p^0(M-1)}{\partial p(N)} \right] + \frac{\partial U^0(N)}{\partial p(N)}; \quad B(1,2) = \frac{\partial U^0(N)}{\partial n(N)};$$

$$B(1,3) = \frac{1}{qh'(N)} \left[\frac{\partial J_p^0(M)}{\partial \psi(N)} - \frac{\partial J_p^0(M-1)}{\partial \psi(N)} \right]; \quad B(2,1) = -\frac{\partial U^0(N)}{\partial p(N)};$$

$$B(2,2) = \frac{1}{qh'(N)} \left[\frac{\partial J_n^0(M)}{\partial n(N)} - \frac{\partial J_n^0(M-1)}{\partial n(N)} \right] - \frac{\partial U^0(N)}{\partial n(N)};$$

$$B(2,3) = \frac{1}{qh'(N)} \left[\frac{\partial J_n^0(M)}{\partial \psi(N)} - \frac{\partial J_n^0(M-1)}{\partial \psi(N)} \right]; \quad B(3,1) = \frac{q}{\varepsilon_0 \varepsilon_r} \left(1 + \frac{\partial N_{TD}^{+0}}{\partial p(N)} - \frac{\partial N_{TA}^{+0}}{\partial p(N)} \right);$$

$$B(3,2) = \frac{-q}{\varepsilon_0 \varepsilon_r} \left(1 + \frac{\partial N_{TA}^{-0}}{\partial n(N)} - \frac{\partial N_{TD}^{+0}}{\partial n(N)} \right); \quad B(3,3) = -\frac{1}{h'(N)} \left(\frac{1}{h(M-1)} + \frac{1}{h(M)} \right);$$

- pour la matrice C :

$$C(1,2) = C(2,1) = C(3,1) = C(3,2) = 0$$

$$C(1,1) = \frac{1}{qh'(N)} \cdot \frac{\partial J_p^0(M)}{\partial p(N+1)};$$

$$C(1,3) = \frac{1}{qh'(N)} \cdot \frac{\partial J_p^0(M)}{\partial \psi(N+1)};$$

$$C(2,2) = \frac{1}{qh'(N)} \cdot \frac{\partial J_n^0(M)}{\partial n(N+1)}$$

$$C(2,3) = \frac{1}{qh'(N)} \cdot \frac{\partial J_n^0(M)}{\partial \psi(N+1)};$$

$$C(3,3) = \frac{1}{h(M)h'(N)}$$

- Pour le vecteur F :

$$F(1) = -\frac{1}{qh'(N)} \cdot [J_p^0(M) - J_p^0(M-1)] - U^0(N)$$

$$F(2) = -\frac{1}{qh'(N)} \cdot [J_n^0(M) - J_n^0(M-1)] + U^0(N)$$

$$F(3) = \frac{-q}{\varepsilon} \left[\Gamma(N) + p^0(N) - n^0(N) + N_{TD}^{+(0)}(N) - N_{TA}^{-(0)}(N) \right] - \gamma_1(N)\psi^0(N-1) \\ - \gamma_2(N)\psi^0(N) - \gamma_3(N)\psi^0(N+1)$$

$\delta y(N) = [\delta p(N), \delta n(N), \delta \psi(N)]^T$ est le vecteur l'inconnu à déterminer.

3.5. Définition des conditions initiales et des conditions aux limites :

La résolution simultanée de ces trois équations, $\psi(x)$, $p(x)$ et $n(x)$ nécessite des valeurs initiales et aussi des conditions aux limites. L'utilisation des bonnes conditions initiales permet une convergence rapide dans le calcul.

Les valeurs initiales sont généralement correspondantes à l'équilibre thermique (pas de polarisation appliquée sur le dispositif).

- Pour la concentration des porteurs libres :

$$\text{Pour la région p} \quad p^0 = -\Gamma, \quad n^0 = -n_i^2 / \Gamma \quad (3.13.a)$$

$$\text{Pour la région n} \quad n^0 = \Gamma, \quad p^0 = n_i^2 / \Gamma \quad (3.13.b)$$

$$\text{Où} \quad \Gamma = N_D - N_A$$

- Pour le potentiel :

$$\text{Pour la région p} \quad \psi^0 = \psi_1 = \frac{1}{\theta} \cdot \ln \left[-\frac{n_i}{\Gamma} \right] \quad (3.14.a)$$

$$\text{Pour la région n} \quad \psi^0 = \psi_1 = \frac{1}{\theta} \cdot \ln \left[+\frac{\Gamma}{n_i} \right] \quad (3.14.b)$$

Si la tension appliquée (V) est différente de zéro (polarisation appliquée sur le dispositif), ψ^0 est donnée par [30] :

$$\psi^0(N) = \left(1 - \frac{V}{\psi_1(1) - \psi_1(L)} \right) \cdot \psi_1(N) + \frac{V}{\psi_1(1) - \psi_1(L)} \cdot \psi_1(L) \quad (3.15)$$

Les conditions aux limites sont:

- Pour les concentrations des porteurs libres

$$p(1) = -\Gamma(1); \quad n(1) = n_i^2 / p(1)$$

$$n(L) = \Gamma(L); \quad p(L) = n_i^2 / n(L)$$

- Pour le potentiel:

$$\psi(1) = V - \frac{1}{\theta} \ln \left[+\frac{p(1)}{n_i} \right] \quad ; \quad \psi(L) = \frac{1}{\theta} \ln \left[+\frac{n(L)}{n_i} \right]$$

3.6. Résolution du système d'équations par la méthode récursive :

La résolution du système d'équation (3.12) se fait en deux étapes :

Premièrement, le système d'équations (3.12) est transformé à un nouveau système contenant les variables inconnues en deux points seulement 'N' et 'N+1' au lieu de trois points, cette nouvelle équation est donnée par:

$$\delta y(N) = B'(N)^{-1} F'(N) - B'(N)^{-1} C'(N) \delta y(N+1) \quad (3.16)$$

Avec:

$$\begin{cases} B'(2) = B(2) \\ C'(2) = C(2) \\ F'(2) = F(2) \end{cases}$$

$$\begin{cases} B'(N) = B(N) - A(N)B'(N-1)^{-1}C'(N-1) \\ C'(N) = C(N) \\ F'(N) = F(N) - A(N)B'(N-1)^{-1}F'(N-1) \end{cases} ; 3 \leq N \leq L-1$$

Alors, dans cette étape on détermine les matrices $B'(N)$, $C'(N)$ et le vecteur $F'(N)$ pour N variant entre 3 et $L-1$.

Deuxièmement, à partir de l'équation (3.16), les $\delta y(N)$ sont calculés pour N variant entre $L-1$ et 2, et comme point de départ : $\delta y(L) = 0$ (aussi : $\delta y(1) = 0$).

3.7. Calcul numérique de la capacité:

Généralement le calcul de la capacité est basé sur le fait que la capacité est la variation de la charge par rapport à la variation de la tension appliquée. Ceci est applicable dans une structure simple p^+n . Dans une structure plus complexe de type $p^+n^-n^+$ ou $n^+p^-p^+$ par exemple, il est recommandé d'utiliser une autre définition de la capacité, c'est la capacité définie par l'énergie potentielle C_w donnée par [31] :

$$C_w = \frac{1}{|\psi|} \frac{dW'}{d\psi} \quad (3.17)$$

ψ : est la différence de potentiel défini par :

$$\psi = V_{bi} - V \quad (3.18)$$

Où V est la tension appliquée, W' est l'énergie potentielle calculée à partir de la distribution du champ électrique $E(x)$:

$$W' = \frac{\varepsilon_r \varepsilon_0}{2} \int_0^d E(x)^2 dx \quad (3.19)$$

ε_0 est la permittivité du vide, ε_r est la permittivité relative et d est la longueur de l'échantillon. Pour une petite variation dans la tension ($d\psi$), la relation (3.17) peut être réécrite sous la forme approximée :

$$C = \frac{1}{|\psi|} \frac{\Delta W'}{\Delta \psi} = \frac{1}{|\psi|} \frac{W'|_{\psi+d\psi} - W'|_{\psi}}{\Delta \psi} \quad (3.20)$$

Les intégrales (3.19) sont transformées aux sommes dans le calcul numérique et ils s'écrivent :

$$W' = \frac{\varepsilon_r \varepsilon_0}{2} \sum_{i=2}^{l-1} \frac{h(i)}{2} (E(i)^2 + E(i+1)^2) \quad (3.21)$$

3.8. Algorithme de calcul :

L'algorithme de calcul est représenté sur la figure 3.2. Les paramètres de la structure sont :

Les dopages des différentes régions (N_D, N_A), la longueur de la structure (nombre de tranches discrétiser L) et la section (S).

Les paramètres d'irradiation sont : La fluence (Φ) (la densité des défauts est proportionnelle à la fluence) et le taux d'introduction des défauts (α, β). Pour les défauts, on définit leur niveaux (E_T), leur section efficace de capture (σ_n, σ_p) et leur densités (N_{TD}, N_{TA}).

Les paramètres de calcul sont : La tension appliquée ($V = \psi(L) - \psi(1)$), la précision de calcul (*erreur*), nombre d'itération, les conditions aux limites ($N(1), P(1), \psi(1), N(L), P(L), \psi(L)$) et la solution initiale $y_0 = [p^0, n^0, \psi^0]^T$ est ensuite proposée. L'étape suivante consiste à calculer δy pour l'ajouter ensuite à y_0 , tester la convergence par rapport à la précision donnée. Si la

condition $|\delta y / y| \leq \text{erreur}$ est réalisée alors le calcul des variables principales (p , n et ψ) est terminé. Si non il est répété jusqu'à où le nombre d'itération est dépassé, et par conséquent pas de convergence.

Finalement la capacité des structures est évaluée par le calcul de la variation de l'énergie potentielle (W) par rapport à une petite variation (ΔV) de la tension appliquée (V) (eq.3.20).

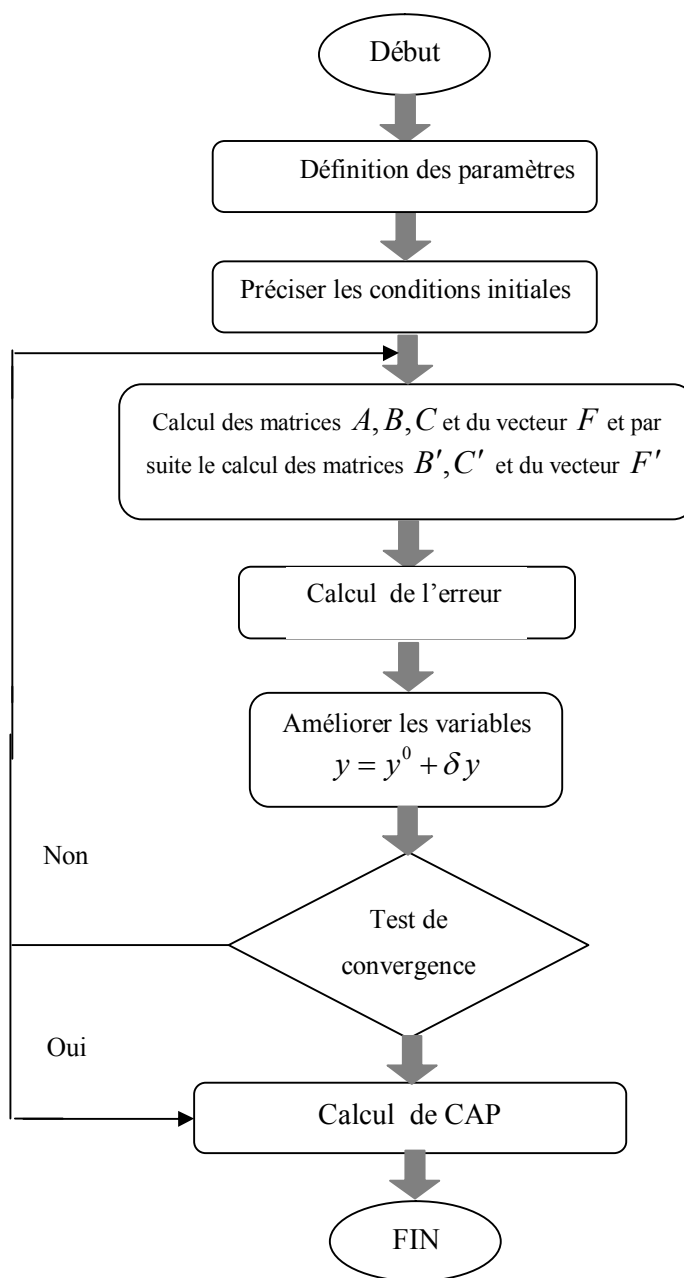


Figure .3.2 : Organigramme de calcul de la capacité.